

Résumé

Nous proposons une solution analytique complète du problème de l'atome d'hydrogène et des ions hydrogénoïdes en général, formulée en termes des nombres bicomplexes. En résolvant l'extension bi-complexe de l'équation différentielle de Schrödinger en coordonnées sphériques, on obtient les valeurs propres et les fonctions propres qui y sont associées sous une forme explicite.

Introduction

Diverses généralisations du système de nombres complexes qui sous-tend la formulation mathématique de la mécanique quantique sont connues depuis quelque temps, mais l'utilisation de l'anneau commutatif des nombres bicomplexes à cette fin est une idée relativement nouvelle.

Nombres et fonctions bicomplexes

On peut définir un nombre bicomplexe w de la façon suivante

$$w := w_1 \mathbf{e}_1 + w_2 \mathbf{e}_2, \quad \text{avec} \quad w_1, w_2 \in \mathbb{C}(\mathbf{i}_1).$$

Les unités imaginaires \mathbf{e}_1 et \mathbf{e}_2 satisfont les propriétés

$$\mathbf{e}_1^2 = \mathbf{e}_1, \quad \mathbf{e}_2^2 = \mathbf{e}_2, \quad \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 = 1 \quad \text{et} \quad \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2 = 0 = \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_1.$$

On additionne et multiplie respectivement deux nombres bicomplexes de la façon suivante

$$w + x = \sum_k (w_k + x_k) \mathbf{e}_k, \quad wx = \sum_k w_k x_k \mathbf{e}_k.$$

Avec l'addition et la multiplication, l'ensemble de ces nombres forme une structure algébrique d'anneau commutatif. On définit une fonction bicomplexe f de n variables bicomplexes w_k comme

$$f(\vec{w}) := f_1(\vec{w}_1) \mathbf{e}_1 + f_2(\vec{w}_2) \mathbf{e}_2.$$

Avec le produit scalaire, la norme et la métrique naturelles, l'ensemble des fonctions bicomplexes quadratiquement intégrables de n variables réelles forme un espace d'Hilbert bicomplexe de dimension infinie.

Équation de Schrödinger

La dynamique d'un système quantique bicomplexe est régie par l'extension de l'équation de Schrödinger

$$\mathbf{i}_1 \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H \Psi(\vec{r}, t).$$

Pour les ions hydrogénoïdes, l'hamiltonien H , qui représente l'opérateur énergie, prend la forme

$$H = \frac{1}{2\mu} P^2 - \frac{Ze^2}{R}, \quad \text{où} \quad P = \sqrt{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2} \quad \text{et} \quad R = \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}.$$

L'axiome de base de notre formalisme consiste à supposer que les composantes tridimensionnelles X_i et P_k des opérateurs de position \vec{R} et d'impulsion \vec{P} satisfont à la relation de commutation canonique

$$[X_i, P_k] = \mathbf{i}_1 \hbar \delta_{ik} (\xi_1 \mathbf{e}_1 + \xi_2 \mathbf{e}_2) I, \quad \text{avec} \quad \xi_1, \xi_2 \in \mathbb{R}^+.$$

Dans la représentation différentielle, l'hamiltonien s'écrit alors

$$H = -\frac{\hbar^2 \xi^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{R}, \quad \text{où} \quad \nabla^2 := \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Valeurs propres de H

L'équation aux valeurs propres associée à celle de Schrödinger est

$$H \Psi_E(\vec{r}) = E \Psi_E(\vec{r}).$$

Les relations de commutation entre l'hamiltonien H , le moment cinétique \vec{L} et le vecteur de Runge-Lenz \vec{A} défini par

$$\vec{A} := \frac{1}{2\mu} (\vec{P} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{P}) - Ze^2 \frac{\vec{R}}{R}$$

conduisent à l'expression suivante pour les niveaux d'énergie hydrogénoïdes E

$$E = \left\{ -\frac{\mu Ze^4}{2\hbar^2 \xi_1^2 n_1^2} \right\} \mathbf{e}_1 + \left\{ -\frac{\mu Ze^4}{2\hbar^2 \xi_2^2 n_2^2} \right\} \mathbf{e}_2.$$

Fonctions propres de H

En écrivant d'abord le Laplacien ∇^2 en coordonnées sphériques, on transforme l'équation aux valeurs propres en une équation différentielle partielle du second ordre. Une séparation des variables réduit ensuite celle-ci à un système de trois équations différentielles ordinaires qu'on résout individuellement par différentes techniques. On trouve finalement que la fonction d'onde spatiale $\Psi_E(\vec{r})$ peut s'écrire explicitement comme

$$\Psi_E(\vec{r}) = u_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi),$$

avec $Y_{lm} := Y_{l_1 m_1} \mathbf{e}_1 + Y_{l_2 m_2} \mathbf{e}_2$ les harmoniques sphériques hyperboliques et u_{nl} la fonction radiale donnée en termes des polynômes de Laguerre hyperboliques

$$u_{nl}(r) = \sum_k \mathbf{e}_k \sqrt{U_{n_k l_k}^0} e^{-\xi_k/2} \zeta_k^{l_k} L_{n_k - l_k - 1}^{2l_k + 1}(\zeta_k).$$

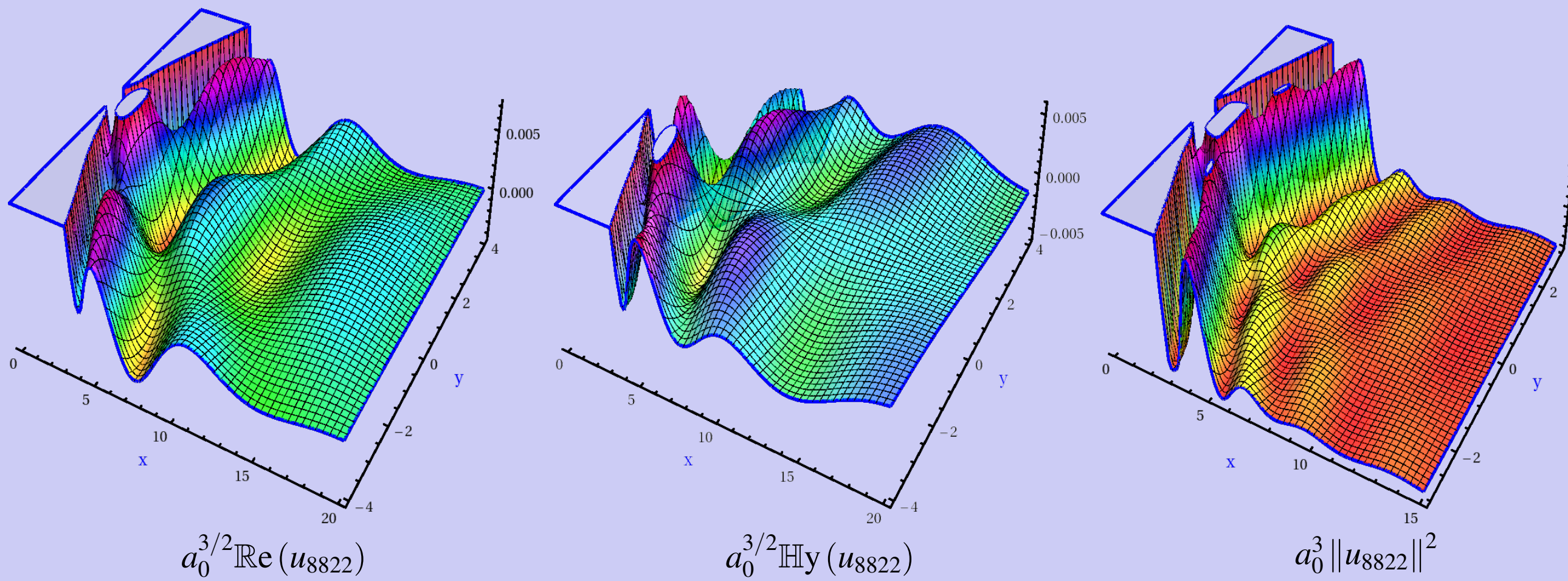


FIGURE. 1 – L'atome d'hydrogène dans l'état propre $(n_1 n_2 l_1 l_2) = (8822)$, avec $\xi_1 = \xi_2 = 1$.

Conclusion

Nous avons obtenu les valeurs propres et les fonctions propres des ions hydrogénoïdes bicomplexes. De plus, pour $n_1 = n_2$, $l_1 = l_2$, $m_1 = m_2$ et $\xi_1 = \xi_2 = 1$, on retrouve le cas habituel, *i.e.* les fonctions d'onde et les niveaux d'énergie de la mécanique quantique standard.

Références

- [1] Baley Price G. *An Introduction to Multicomplex Spaces and Functions*, 1st edition, Marcel Dekker Inc., University of Kansas (1990).
- [2] Gervais Lavoie R., Marchildon L. et Rochon D. *The Bicomplex Quantum Harmonic Oscillator*, Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis. (2010).
- [3] Marchildon L. *Mécanique Quantique*, 1ière édition, de Boeck Université (2000).
- [4] Rochon D. et Shapiro M. *On Algebraic Properties of Bicomplex and Hyperbolic Numbers*, Anal. Univ. Oradea (2004).
- [5] Rochon D. et Tremblay S. *Bicomplex Quantum Mechanics : II. The Hilbert Space*, Birkhäuser Verlag Basel/Switzerland (2006).